

TARTU ÜLIKOOL

Loodus- ja täppisteaduste valdkond

Füüsika instituut

Taimo Priinits

**KONKUREERIVAD TSOONIDEVAHELISED
INTERAKTSIOONID KAHEPILULISES ÜLIJUHIS**

Bakalaureusetöö (6 EAP)

Füüsika eriala

Juhendaja: Teet Örd, Ph.D.

Tartu 2019

Konkureerivad tsoonidevahelised interaktsioonid kahepilulises ülijuhhis

Kahepilulises ülijuhhis võimendab nii tsoonidevaheline tõmbeinteraktsioon kui ka tõukeinteraktsioon ülijuhtivust. Kuid need kaks interaktsiooni genereerivad erineva struktuuriga korrastusi, millest tulenevalt tekib nende vaheline konkurents. Käesolevas töös on uuritud, kuidas sellised konkureerivad interaktsioonikanalid mõjutavad ülijuhtivust. Keskmise välja lähenduses tuletasime võrrandisüsteemi ülijuhtivus pilude määramiseks. Tehti kindlaks, kuidas tsoonidevahelise tõmbe- ja tõukeinteraktsiooni konkurents mõjutab ülijuhtivust kirjeldavaid karakteristikuid. Näidati, et faasisiirete temperatuuri kõver omab sõltuvalt tsoonidevahelistest interaktsioonidest miinimumi. Leiti tõukeinteraktsiooni kriitiline väärtus, mille korral toimub pilude faaside vahe hüppeline muutus. Tõukeinteraktsiooni kriitilise väärtuse korral leiavad aset kaks autonoomset faasisiiret.

Märksõnad: kahepiluline ülijuhtivus, tsoonidevaheline tõmbeinteraktsioon, tsoonidevaheline tõukeinteraktsioon

CERCS kood: P260 Tahke aine: elektrooniline struktuur, elektrilised, magneetilised ja optilised omadused, ülijuhtivus, magnetresonants, spektroskoopia

Competing interband interactions in a two-gap superconductor

In two-gap superconductors both interband attractive and repulsive interaction contribute to promoting superconductivity. However, those interactions generate superconductivity with different structures resulting in competition between interactions. In this work, we examine how the interband interactions affect two-band superconductivity. From mean field Hamiltonian we derive equation system for the superconducting gaps. It was determined how the competition of interband attractive and repulsive interactions affect characteristics of superconductivity. It was shown that phase transition temperature curve depending on the interband interactions has a minimum. The critical value of repulsive interaction was found which triggered a change in phase difference of the gaps. At the critical value of repulsive interaction two autonomous phase transitions occur.

Keywords: two-band superconductivity, attractive interband interaction, repulsive interband interaction

CERCS code: P260 Condensed matter: electronic structure, electrical, magnetic and optical properties, supraconductors, magnetic resonance, relaxation, spectroscopy

Sisukord

Sissejuhatus	4
1 Kahetsoonilise ülijuhtivuse teoreetiline kirjeldamine	5
1.1 Tõmbe- ja tõukeinteraktsioon	6
1.2 Ülijuhtivuspilude eksperimentaalne mõõtmine	7
1.2.1 Kaudne mõõtmine	7
1.2.2 Otsene mõõtmine	7
2 Mitme interaktsioonikanaliga kahetsoonilise ülijuhi hamiltoniaan	9
2.1 Hamiltoniaani diagonaliseerimine	9
2.2 Interaktsioonide lähendamine	12
3 Ülijuhtiva faasisiirde temperatuur	14
4 Ülijuhtivuspilude faaside vahe	18
5 Ülijuhtivuspilude sõltuvus temperatuurist	20
6 Nulltemperatuurne ülijuhtivus	22
Kokkuvõte	25
Tänuavaldused	26
Viited	27
Lihtlitsents	29

Sissejuhatus

Ülijuhtivus avastati H. Kammerling Onnesi ja tema assistendi G. Holsti poolt 1911. aastal, kui pandi tähele, et elavhõbeda takistus kukkus nulli lähedale, kui selle temperatuuri langetada alla 4,2 Kelvini [1]. Sellest avastusest alates on intensiivselt uuritud antud nähtust.

Kuid alles 1957. aastal pandi J. Bardeeni, L. Cooperi ja R. Schriefferi poolt kirja esimene mikroskoopiline, metallides tekkivat ülijuhtivust seletav teooria. Saadud kirjeldust nimetatakse BCS-teooriaks, teooria kujutab ülijuhtivust läbi elektron-foonon vastasmõju, mis tekitab elektronide vahel tõmbeinteraktsiooni [2]. Praeguse töö kontekstis on see BCS teooria ühetsooniline mudel.

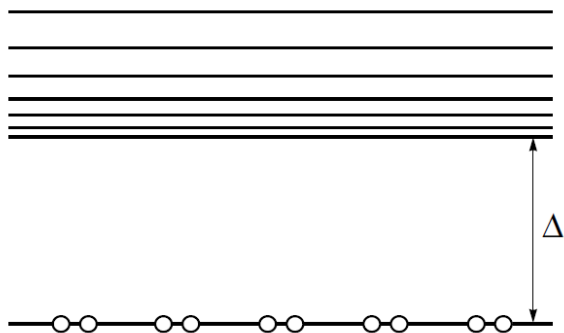
1959. a. täiendasid H. Suhl, B. T. Matthias ja L. R. Walker BCS-teooriat, tuues sisse kahetsoonilise mudeli, kus kattuvate energiatega elektronseisundite vastasmõju tekitab ülijuhtivust, selline olukord tekib ülemineku metallides, kus s- ja p-elektronide vahel tekivad mainitud interaktsioonid [3]. Kahetsoonilise teooriaga saab kirjeldada ka muid ülijuhtivaid ühendeid, kui materjal omab Fermi energia lähedal mitmetsoonilist energiate struktuuri. Magneesiumdiboriid (MgB_2) oli esimene ühend, kus mõõdeti kahte erinevat pilu, alles 2001. a., sellest tulenevalt on MgB_2 ka enim uuritud materjal, mille omadusi kirjeldatakse kahetsoonilise mudeliga [4]. Kuigi MgB_2 -s ülijuhtivust tekitavad ikkagi Cooperi paarid, omab see võõreldes klassikaliste ülijuhtidega omapäraseid füüsikalisi omadusi, tänu oma energiatsoonide iseärasusele. Lisaks peale mitmetsoonilise ülijuhtivuse kindlaks tegemist, on tähele pandud, et ka mitmed varem avastatud ülijuhid on tegelikult mitmetsoonilised ülijuhid (NbSe_2 , $\text{Lu}_2\text{Fe}_3\text{Si}_5$, jm.) [5].

Töö eesmärgiks on tuletada efektiivsest elektron-elektron hamiltoniaanist pilu võrrandid, neid analüüsides uurida, kuidas tsoonidevaheline tõmbe- ja tõukeinteraktsiooni mõjutab ülijuhtivust. Mõlemad interaktsioonid küll soodustavad ülijuhtivust, kuid genereerivad erinevate struktuuridega ülijuhtivust. Uurime, kuidas need kaks interaktsiooni konkureerivad teineteisega.

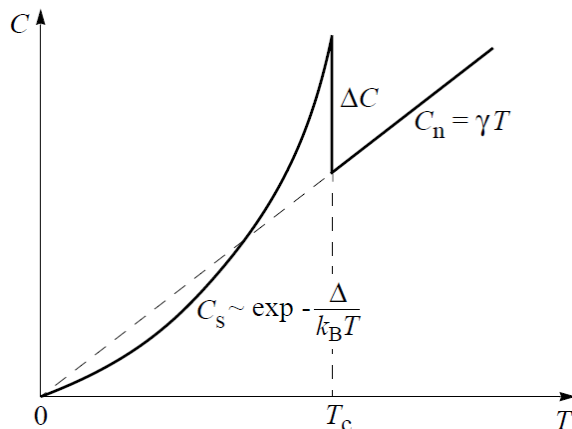
1 Kahetsoonilise ülijuhtivuse teoreetiline kirjeldamine

BCS teooria edukus seisneb tõsiasi, et see suudab seletada põhilisi ülijuhtivusest tingitud nähtusi, milleks on [2]:

- 1) teist järku faasisiire kriitilisel temperatuuril (vt. joonis 1.2) [6];
- 2) elektronide erisoojuse muutus eksponentsiaalselt nulltemperatuuri lähedal (vt. joonis 1.2) [7];
- 3) elektronide ergastamiseks vajaliku energia vahemiku Δ ennustamine (vt. joonis 1.1), mida ka BCS teooria arendamise ajal suudeti eksperimentaalselt mõõta [8];
- 4) seob Meissneri efekti lõpmata kõrge juhtivusega [9];
- 5) selgitab isotoobi efekti [10].



Joonis 1.1: Põhioleku ja ergastatud olekute vahelist energiapilu illustreeriv joonis [11].



Joonis 1.2: Erisoojuse sõltuvus temperatuurist ülijuhtivas ($0 < T < T_c$) ja normaalfaasis ($T > T_c$) [11].

Kuid teooria ei ole täiuslik, BCS teooria puudustest saab lugeda Hirschini artiklist [12]. Seal mainitakse, et suurimaid puudusi tänapäeval on teooria võimetus ennustada, kas mingi ühendite klass on ülijuhtiv.

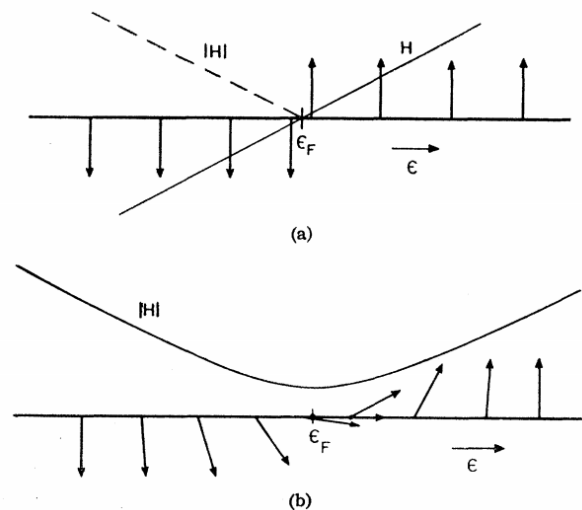
Esialgne BCS teooriat on saanud mitmeid täiendusi. Üks esimesi oli Eliashberg, kes arvestas interaktsioone vahendavate osakeste kiirustega [13]. Eliashbergi teooria on kooskõlas traditsiooniliste ülijuhtidega.

Shul, Matthias, Walker (SMW) poolt väljapakutud BCS mudeli üldistus kahele tsoonile oli tingitud asjaolust, et üleminekumetallide ülijuhtivusomadused ei langenud kokku teooriaga [3]. Mudeli põhiideeks on s- ja d-orbitaalide kattumisest tulenev orbitaalide vaheline interaktsioon, millest tingitult tekib Fermi pinnale mitmeid ülijuhtivus kanaleid. Tsoonide vaheline interaktsioon realiseerub Cooperi paaride tunnelleerumisega kahe tsooni vahel, mis võimendab ülijuh-

tivust [14]. Kahe erineva tsooni olemasolust tingitult käituvad ülijuhi termodünaamilised suurused erinevalt võrreldes ühetsoonilise mudeliga. Lisaks näitas Kondo, et mitte ainult foononite poolt vahendatud elektronide vaheline efektiivne tõmbeinteraktsioon ei soodusta ülijuhtivust, vaid seda teeb ka elektronidevaheline tõukeinteraktsioon [15]. Kahetsooniline teooria on saanud veel mitmeid täiendusi, mille põhiliseks eesmärgiks on kirjeldada kõrge T_c -ga ülijuhte. Pärast MgB_2 -e kahetsoonilisuse eksperimentaalset kindlaks tegemist [16, 17] on intensiivselt uuritud kahepilulisi ülijuhte ning on ka arendatud rohkemate piludega süsteeme.

1.1 Tõmbe- ja tõukeinteraktsioon

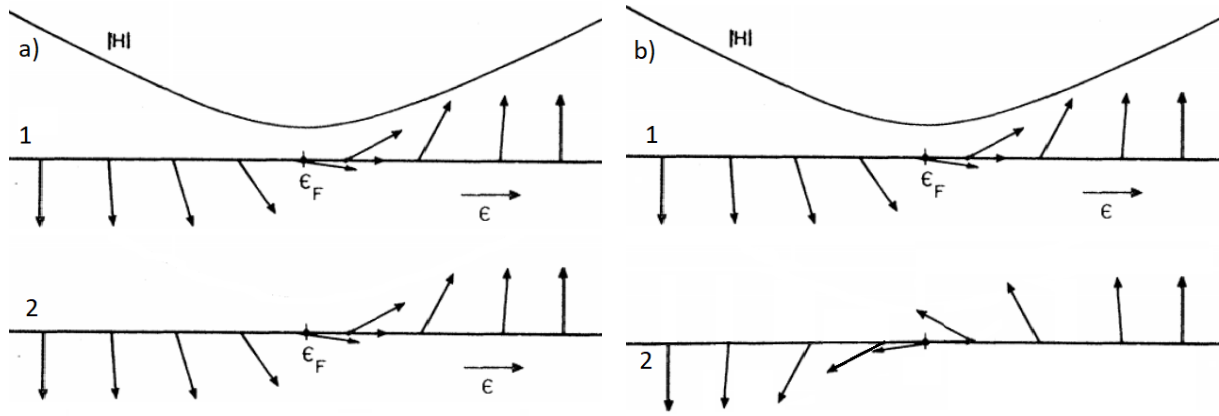
Nagu eespool mainitud, võimendavad tsoonidevahelised interaktsioonid ülijuhtivust, kuid nende poolt tekitatud korrastused on erineva struktuuriga, st. koos mõjude hakkavad need interaktsioonid konkureerima. Nähtuse selgitamiseks, saame kasutada järgmist tõlgendust: elektronpaaride (Cooperi paaride) alamsüsteemis võime tõmbeinteraktsiooni kujutada kui ferromagnetilist tüüpi pseudospinnide korrastust ning tõukeinteraktsiooni kui pseudo spinnide antiferromagnetilist tüüpi korrastust. Pseudospinnide käitumist ühetsoonilise süsteemi normaalses ja ülijuhtivas faasis on kujutatud joonisel 1.3 [18].



Joonis 1.3: Ühetsoonilise elektrongaasi kirjeldamine pseudospinnformalismis. (a) Normaalfaa- sis olev Fermi meri. Alla suunatud nooled vastavad täidetud elektronseisunditele ja üles suunatud tühjadele elektronseisunditele. (b) Ülijuhi põhiolekut iseloomustavad pseudospinnid. H - fiktiivne väli, mis mõjub pseudospinnidele [19].

Vaatleme nüüd kahetsoonilist süsteemi.

Siin on võimalik nii ferromagnetilist kui ka antiferromagnetilist tüüpi pseudospinnide korrastus, sõltuvat tsoonidevahelise interaktsiooni iseloomust, vt. joonis 1.4 ja ka [18]. Juhul kui domineerib tsoonidevaheline tõmbeinteraktsioon, realiseerub pseudoferromagnetiline olek (vt. joo-



Joonis 1.4: Pseudospinn vektorid kahetsoonilises süsteemis. a) Ferromagneerilist tüüpi korrastus. b) Antiferromagneetilis tüüpi korrastus.

nis 1.4a). Sellele vastab eritsoonide ülijuhtivuspilude faaside vahe $\Delta\phi = 2n\pi$, $n \in \mathbb{Z}$. Kui aga tsoonidevaheline tõukeinteraktsioon on domineeriv, siis realiseerub pseudoantiferromagnetiline olek (vt. joonis 1.4b), millele vastab faaside vahe $\Delta\phi = (2n+1)\pi$, $n \in \mathbb{Z}$.

1.2 Ülijuhtivuspilude eksperimentaalne mõõtmine

Ülijuhtivuspilude eksperimentaalseks mõõtmiseks on mitmeid võimalusi, nii otseseid kui ka kaudseid. Toome näitena mõned meetodid.

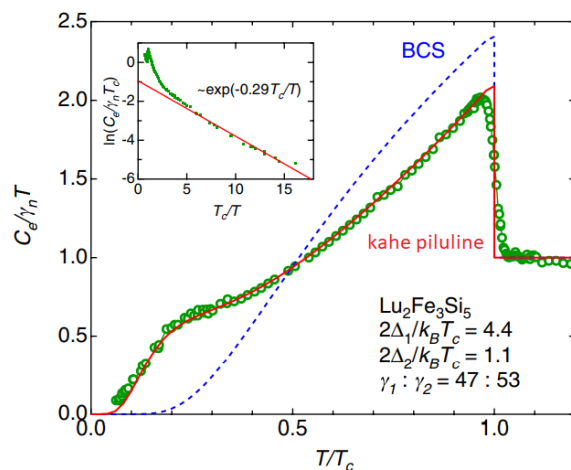
1.2.1 Kaudne mõõtmine

Üheks võimalikuks kaudseks meetodiks on materjali erisoojus mõõtmine ülijuhtivas faasis. Erisoojuse hüpe kriitilise temperatuuri juures on võrdeline ülijuhtivus pilu laiussega. Kahetsoonilise materjali korral erisoojuse hüpe kriitilise temperatuuri juures ning madaltemperatuurne käitumine ei vasta standardsele ühetsoonilisele käitumisele [4], vt. joonis 1.5.

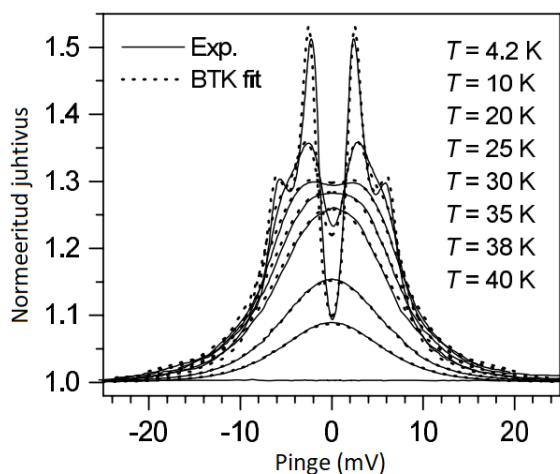
Lisaks on võimalik pilusid mõõta läbi Sommerfeldi koefitsiendi magnetväljast sõltuvuse määramisega [21], soojusjuhtivuse [22] jne.

1.2.2 Otsene mõõtmine

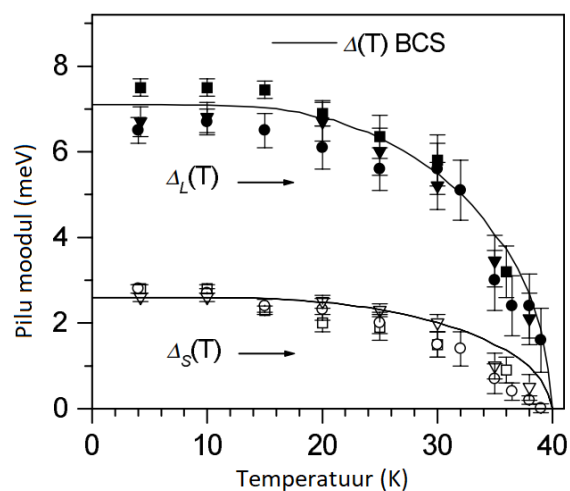
Kõige otsesem meetod on pilude struktuuri määramine Fermi pinnal, mis aga alati ei ole võimalik. Kõikide materjalidega ei ilme pilud alati tunnelspektroskoopias, samuti materjalide anisotroopsus võib anda erineva tulemuse ning nurk-lahendus fotoemissioon spektroskoopia (angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES) samuti ei sobi kõikide materjalidega [4]. Joonistelt 1.6 ja 1.7 on näidatud MgB_2 -e, mis on kahetsooniline süsteem, mõõtmistulemusi punkt-kontakt spektroskoopiaga (point-contact spectroscopy) [16].



Joonis 1.5: $\text{Lu}_2\text{Fe}_3\text{Si}_5$ -e taandatud elektroonse erisoojuse sõltuvus temperatuurist. Katkendlik ja pidev joon on vastavalt ühe- ja kahtsooniline BCS teooria ning punktid vastavad katseandmetele [20].



Joonis 1.6: Punktkontakt spektromeetriga mõõdetud (pidev joon) Cu-MgB_2 -e normeeritud juhtivuse sõltuvus rakendatavast pingest erinevatel temperatuuridel, punktiiriga on tähistatud sobitatud joon [16].



Joonis 1.7: Ülijuhtivuspilude sõltuvus temperatuurist MgB_2 -s. Täidetud ja tühjad sümbolid on eksperimendi tulemused ning pidev joon BCS-i ennustus [16]

2 Mitme interaktsioonikanaliga kahetsoonilise ülijuhi hamiltoniaan

Paneme kirja kahetsoonilise ülijuhi elektronilamsüsteemi hamiltoniaani, tuues eraldi välja elektronidevahelise tõmbe- ja tõukeinteraktsiooni.

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \sum_s \tilde{\varepsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) a_{\alpha\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{\alpha\mathbf{k}s} + \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow} a_{\alpha\mathbf{k}'\uparrow} + \\ & + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') a_{1\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{1-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} a_{2-\mathbf{k}'\downarrow} a_{2\mathbf{k}'\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') a_{1\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{1-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} a_{2-\mathbf{k}\downarrow} a_{2\mathbf{k}'\uparrow} + \\ & + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') a_{2\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{2-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} a_{1-\mathbf{k}'\downarrow} a_{1\mathbf{k}'\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') a_{2\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{2-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} a_{1-\mathbf{k}\downarrow} a_{1\mathbf{k}'\uparrow} . \end{aligned} \quad (2.1)$$

Siin a^{\dagger} ja a on ülijuhtivus elektroni tekke ja kadumise operaatorid, $\alpha = 1, 2$ on tsooni indeks, \mathbf{k} on elektroni lainvektor, $s = \uparrow, \downarrow$ on spinni indeks, $\tilde{\varepsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{k}) - \mu$ on elektroni energia tsoonis α , μ on keemiline potentsiaal, $V_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ on tsooniseesmise ($\alpha = \alpha'$) või tsoonidevahelise ($\alpha \neq \alpha'$) efektiivse tõmbeinteraktsiooni konstant ja $U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ on tsoonidevahelise tõukeinteraktsiooni konstant. Efektiivne elektronidevaheline tõmbeinteraktsioon on indutseeritud elektron-foonon interaktsiooni poolt.

2.1 Hamiltoniaani diagonaliseerimine

Kasutame nüüd keskmise välja lähendust, mille käigus defineerime ka ülijuhtivuspilud, mis kirjeldavad ülijuhtivat faasi ja faasisiiret. Selleks teeme järgmise asenduse

$$a^{\dagger} a^{\dagger} a a \rightarrow \langle a^{\dagger} a^{\dagger} \rangle a a + a^{\dagger} a^{\dagger} \langle a a \rangle - \langle a^{\dagger} a^{\dagger} \rangle \langle a a \rangle . \quad (2.2)$$

Seega keskmise välja lähenduses avaldub hamiltoniaan (2.1) kujul:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{mf} = & \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \sum_s \tilde{\varepsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) a_{\alpha\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{\alpha\mathbf{k}s} + \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\alpha\mathbf{k}} a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^* a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow} a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow} \right) - \\ & - \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\alpha\mathbf{k}} \langle a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle \end{aligned} \quad (2.3)$$

ning ülijuhtivuspilud on defineeritud nagu

$$\begin{aligned}
\Delta_{1\mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{k}'} V_{11}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle a_{1-\mathbf{k}'\downarrow} a_{1\mathbf{k}'\uparrow} \rangle + \sum_{\mathbf{k}'} V_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle a_{2-\mathbf{k}'\downarrow} a_{2\mathbf{k}'\uparrow} \rangle + \\
&\quad + \sum_{\mathbf{k}'} U_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle a_{2-\mathbf{k}'\downarrow} a_{2\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \\
\Delta_{2\mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{k}'} V_{22}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle a_{2-\mathbf{k}'\downarrow} a_{2\mathbf{k}'\uparrow} \rangle + \sum_{\mathbf{k}'} V_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle a_{1-\mathbf{k}'\downarrow} a_{1\mathbf{k}'\uparrow} \rangle + \\
&\quad + \sum_{\mathbf{k}'} U_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle a_{1-\mathbf{k}'\downarrow} a_{1\mathbf{k}'\uparrow} \rangle.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Valemites (2.3) ja (2.4) olevad keskväärtused avalduvad läbi elektronalamüsteemi hamiltoniaani keskmise välja lähenduse

$$\begin{aligned}
\langle \dots \rangle_{\hat{H}_{mf}} &= Z^{-1} Sp \dots \exp \left(-\frac{\hat{H}_{mf}}{k_B T} \right), \\
Z &= Sp \exp \left(-\frac{\hat{H}_{mf}}{k_B T} \right)
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Hamiltoniaani (2.3) saab diagonaliseerida kasutades Bogoliubov-Valatini teisendust [23]

$$\begin{aligned}
a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\alpha\mathbf{k}} \alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow} + v_{\alpha\mathbf{k}}^* \alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\
a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow} &= u_{\alpha\mathbf{k}} \alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow} - v_{\alpha\mathbf{k}}^* \alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^\dagger,
\end{aligned} \tag{2.6}$$

kus

$$|u_{\alpha\mathbf{k}}|^2 + |v_{\alpha\mathbf{k}}|^2 = 1, \quad u_{\alpha-\mathbf{k}} = u_{\alpha\mathbf{k}}, \quad v_{\alpha-\mathbf{k}} = -v_{\alpha\mathbf{k}}. \tag{2.7}$$

Keskväärtused avalduvad kujul [24]

$$\langle a_{\alpha-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\alpha\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = -\frac{1}{2} \Delta_{\alpha\mathbf{k}} \xi_{\alpha\mathbf{k}}, \tag{2.8}$$

kus

$$\xi_{\alpha\mathbf{k}} = E_{\alpha}^{-1}(\mathbf{k}) \tanh \frac{E_{\alpha}(\mathbf{k})}{2k_B T} \tag{2.9}$$

Pärast teisendust on hamiltoniaan (2.3) kujul

$$\begin{aligned}
\hat{H}_m f = & \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \left(2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) |v_{\alpha\mathbf{k}}|^2 + \Delta_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}} u_{\alpha\mathbf{k}}^* + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^* u_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}}^* + \frac{1}{2} |\Delta_{\alpha\mathbf{k}}|^2 \xi_{\alpha\mathbf{k}} \right) + \\
& + \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \left[\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) \left(|u_{\alpha\mathbf{k}}|^2 - |v_{\alpha\mathbf{k}}|^2 \right) - \Delta_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}} u_{\alpha\mathbf{k}}^* - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^* u_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}}^* \right] \cdot \\
& \cdot \left(\alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow} + \alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow} \right) + \\
& + \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \left[2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) u_{\alpha\mathbf{k}}^* v_{\alpha\mathbf{k}} + \Delta_{\alpha\mathbf{k}} (u_{\alpha\mathbf{k}}^*)^2 - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^* (v_{\alpha\mathbf{k}}^*)^2 \right] \alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + \\
& + \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \left[2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) u_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}} - \Delta_{\alpha\mathbf{k}} (v_{\alpha\mathbf{k}})^2 + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^* (u_{\alpha\mathbf{k}})^2 \right] \alpha_{\alpha-\mathbf{k}\uparrow} \alpha_{\alpha\mathbf{k}\downarrow}.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Et hamiltoniaan oleks diagonaliseeritud nõuame, et operaatorite $\alpha\alpha$ ja $\alpha^{\dagger}\alpha^{\dagger}$ ees olevad kordajad oleksid võrdsed nulliga, st.

$$2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) u_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}} - \Delta_{\alpha\mathbf{k}} (v_{\alpha\mathbf{k}})^2 + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^* (u_{\alpha\mathbf{k}})^2 = 0. \tag{2.11}$$

Tähistame

$$2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) |v_{\alpha\mathbf{k}}|^2 + \Delta_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}} u_{\alpha\mathbf{k}}^* + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^* u_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}}^* + \frac{1}{2} |\Delta_{\alpha\mathbf{k}}|^2 \xi_{\alpha\mathbf{k}} = E_0 \tag{2.12}$$

$$\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) \left(|u_{\alpha\mathbf{k}}|^2 - |v_{\alpha\mathbf{k}}|^2 \right) - \Delta_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}} u_{\alpha\mathbf{k}}^* - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^* u_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}}^* = E_{\alpha}(\mathbf{k}) \tag{2.13}$$

Kui tingimus (2.11) kehtib, saab hamiltoniaan kuju

$$\hat{H}_m f = E_0 + \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \sum_s E_{\alpha}(\mathbf{k}) \alpha_{\alpha\mathbf{k}s}^{\dagger} \alpha_{\alpha\mathbf{k}s}, \tag{2.14}$$

kui E_0 on ülijuhi põhiseisundi energia, kui $T = 0$ ning $E_{\alpha}(\mathbf{k})$ on ergastusenergia.

Valemitest (2.11) ja (2.13) saame avaldada Bogoliubov-Valatini teisenduse kordajad u ja v

$$\begin{aligned}
|u_{\alpha\mathbf{k}}|^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k})}{E_{\alpha}(\mathbf{k})} \right) \\
|v_{\alpha\mathbf{k}}|^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k})}{E_{\alpha}(\mathbf{k})} \right) \\
u_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}}^* &= -\frac{1}{2} \frac{\Delta_{\alpha\mathbf{k}}}{E_{\alpha}(\mathbf{k})}
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Asendades (2.15) valemitesse (2.12) ja (2.13) saame ergastusenergia ja põhiseisundi energia

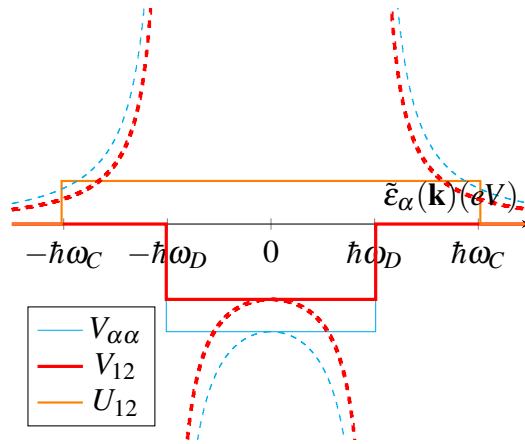
$$\begin{aligned}
E_{\alpha}(\mathbf{k}) &= \sqrt{\tilde{\epsilon}_{\alpha}^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{\alpha\mathbf{k}}|^2} \\
E_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) - E_{\alpha}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} |\Delta_{\alpha\mathbf{k}}|^2 \xi_{\alpha\mathbf{k}} \right\}
\end{aligned} \tag{2.16}$$

2.2 Interaktsioonide lähendamine

Lähendame interaktsioonikonstante järgmiselt (vt. joonis 2.1)

$$\begin{aligned}
 V_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= V_{\alpha\alpha} \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k}')|) \\
 V_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= V_{12} \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{k}')|) \\
 V_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= V_{21} \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{k}')|) \\
 U_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= U_{12} \Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{k}')|) \\
 U_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= U_{21} \Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{k}')|),
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

kus $\Theta(x)$ on Heaviside'i funktsioon, $\hbar\omega_C \geq \hbar\omega_D$, $V_{\alpha\alpha} < 0$, $V_{12} = V_{21} < 0$ ja $U_{12} = U_{21} > 0$. Vastavalt muutuvad ka ülijuhtivuspilud



Joonis 2.1: Interaktsioonikonstantide lähendusi illustreeriv joonis. Katkendlik joon näitab, milline on tõmbeinteraktsioon sõltuvana elektroni energiast, mis sisaldab ka mittefüüsikalist singulaarsust [24].

$$\Delta_{\alpha\mathbf{k}} = \Delta_\alpha \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|) + \tilde{\Delta}_\alpha [\Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|) - \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|)] \tag{2.18}$$

Saame võrrandisüsteemi pilude leidmiseks

$$\begin{cases}
 \Delta_1 = -\Delta_1 V_{11} \rho_1 \eta_1(T, \Delta_1) - \Delta_2 V_{12} \rho_2 \eta_2(T, \Delta_2) - \Delta_2 U_{12} \rho_2 \tilde{\eta}_2(T, \tilde{\Delta}_2) - \tilde{\Delta}_2 U_{12} \rho_2 \tilde{\eta}_2(T, \tilde{\Delta}_2) \\
 \Delta_2 = -\Delta_2 V_{22} \rho_2 \eta_2(T, \Delta_2) - \Delta_1 V_{21} \rho_1 \eta_1(T, \Delta_1) - \Delta_1 U_{21} \rho_1 \eta_1(T, \Delta_1) - \tilde{\Delta}_1 U_{21} \rho_1 \tilde{\eta}_1(T, \tilde{\Delta}_1) \\
 \tilde{\Delta}_1 = -\tilde{\Delta}_2 U_{12} \rho_2 \tilde{\eta}_2(T, \tilde{\Delta}_2) - \Delta_2 U_{12} \rho_2 \eta_2(T, \Delta_2) \\
 \tilde{\Delta}_2 = -U_{21} \tilde{\Delta}_1 \rho_1 \tilde{\eta}_1(T, \tilde{\Delta}_1) - \Delta_1 U_{21} \rho_1 \eta_1(T, \Delta_1)
 \end{cases}, \tag{2.19}$$

kus

$$\begin{aligned}
\eta_\alpha(T, \Delta_\alpha) &= \int_0^{\hbar\omega_D} E^{-1}(\Delta_\alpha) \tanh \frac{E(\Delta_\alpha)}{2k_B T} d\tilde{\epsilon}_\alpha \\
\tilde{\eta}_\alpha(T, \tilde{\Delta}_\alpha) &= \int_{\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_C} E^{-1}(\tilde{\Delta}_\alpha) \tanh \frac{E(\tilde{\Delta}_\alpha)}{2k_B T} d\tilde{\epsilon}_\alpha \\
E(\Delta_\alpha) &= \sqrt{\tilde{\epsilon}_\alpha^2 + |\Delta_\alpha|^2} \\
E(\tilde{\Delta}_\alpha) &= \sqrt{\tilde{\epsilon}_\alpha^2 + |\tilde{\Delta}_\alpha|^2}
\end{aligned} \tag{2.20}$$

ja ρ_α on elektronolekute tihedus Fermi pinnal tsoonis α .

Integraali $\tilde{\eta}_\alpha$ saame ligikaudu ära võtta. Eeldades, et $k_B T_c, |\Delta_\alpha| \ll \hbar\omega_D$, saame

$$E(\tilde{\Delta}_\alpha) = \sqrt{\tilde{\epsilon}_\alpha^2 + |\tilde{\Delta}_\alpha|^2} \approx \tilde{\epsilon}_\alpha, \tag{2.21}$$

ja seega

$$\tilde{\eta}_\alpha(T, \tilde{\Delta}_\alpha) \approx \ln \frac{\hbar\omega_C}{\hbar\omega_D} \equiv \tilde{\eta}. \tag{2.22}$$

Saadud seos iseloomustab tõmbe- ja tõukeinteraktsioonide energeetilise ulatuse suhet.

Eemaldame võrrandisüsteemist (2.19) $\tilde{\Delta}_\alpha$ -d:

$$\begin{cases} \Delta_1 [1 + V_{11}\rho_1\eta_1(T, \Delta_1) + V_{21}\rho_1\eta_1(T, \Delta_1)U_{12}\rho_2\tilde{\eta}] + \\ + \Delta_2 [(V_{12} + U_{12})\rho_2\eta_2(T, \Delta_2) + (1 + V_{22}\rho_2\eta_2(T, \Delta_2))U_{12}\rho_2\tilde{\eta}] = 0 \\ \Delta_1 [(V_{21} + U_{21})\rho_1\eta_1(T, \Delta_1) + (1 + V_{11}\rho_1\eta_1(T, \Delta_1))U_{21}\rho_1\tilde{\eta}] + \\ + \Delta_2 [1 + V_{22}\rho_2\eta_2(T, \Delta_2) + V_{12}\rho_2\eta_2(T, \Delta_2)U_{21}\rho_1\tilde{\eta}] = 0 \end{cases} \tag{2.23}$$

Võrrandisüsteem (2.23) üldjuhul ei lahendu analüütiliselt, kuid teatud piirjuhtudel on võimalik leida ka analüütilised lahendid.

3 Ülijuhtiva faasisiirde temperatuur

Järgnevalt leiame kahetsoonilise ülikjuhi faasisiirde temperatuuri.

Arvestades, et $\hbar\omega_D \gg 2k_B T_c$, saame η (2.20) integreerimisel

$$\eta(T_c, 0) \approx \ln \frac{2\hbar\omega_D e^\gamma}{k_B T_c \pi} \equiv \eta, \quad \gamma = 0,577\dots, \quad (3.1)$$

tsoonist sõltuvus kaob T_c juures ära.

Kui $T \rightarrow T_c^-$, siis võime võrrandisüsteem (2.23) lineariseerida, mis annab

$$\begin{cases} \Delta_1[1 + V_{11}\rho_1\eta + V_{21}\rho_1\eta U_{12}\rho_2\tilde{\eta}] + \Delta_2[(V_{12} + U_{12})\rho_2\eta + (1 + V_{22}\rho_2\eta)U_{12}\rho_2\tilde{\eta}] = 0 \\ \Delta_1[(V_{21} + U_{21})\rho_1\eta + (1 + V_{11}\rho_1\eta)U_{21}\rho_1\tilde{\eta}] + \Delta_2[1 + V_{22}\rho_2\eta + V_{12}\rho_2\eta U_{21}\rho_1\tilde{\eta}] = 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

Viime võrrandisüsteemi (3.2) kujule

$$\begin{cases} \Delta_1[1 + a_1\eta] + \Delta_2[A_2\eta + B_2] = 0 \\ \Delta_1[A_1\eta + B_1] + \Delta_2[1 + a_2\eta] = 0 \end{cases}, \quad (3.3)$$

kus

$$\begin{aligned} a_1 &= V_{11}\rho_1 + V_{21}\rho_1 U_{12}\rho_2\tilde{\eta} \\ a_2 &= V_{22}\rho_2 + V_{12}\rho_2 U_{21}\rho_1\tilde{\eta} \\ A_1 &= V_{21}\rho_1 + U_{21}\rho_1 + V_{11}\rho_1 U_{21}\rho_1\tilde{\eta} \\ A_2 &= V_{12}\rho_2 + U_{12}\rho_2 + V_{22}\rho_2 U_{12}\rho_2\tilde{\eta} \\ B_1 &= U_{21}\rho_1\tilde{\eta} \\ B_2 &= U_{12}\rho_2\tilde{\eta}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Võrrandisüsteemile (3.3) leiduvad mittetriviaalsed lahendid, kui on täidetud tingimus

$$\begin{vmatrix} 1 + a_1\eta & A_2\eta + B_2 \\ A_1\eta + B_1 & 1 + a_2\eta \end{vmatrix} = 0, \quad (3.5)$$

mis kujutab endast võrrandit faasisiirde temperatuuri määramiseks.

Arvutades determinandi, saame

$$\eta^2(a_1a_2 - A_1A_2) + \eta(a_1 + a_2 - A_1B_2 - A_2B_1) + 1 - B_1B_2 = 0. \quad (3.6)$$

Lahendame saadud võrrandi η suhtes. Tulemuseks on

$$\eta_{\pm} = \frac{2(B_1B_2 - 1)}{a_1 + a_2 - A_1B_2 - A_2B_1 \pm \sqrt{(a_1 + a_2 - A_1B_2 - A_2B_1)^2 - 4(a_1a_2 - A_1A_2)(1 - B_1B_2)}} \quad (3.7)$$

Võrrandist (3.1) saame avaldada kriitilised temperatuurid

$$T_{c\pm} = \frac{2\hbar\omega_D e^{\gamma}}{k_B\pi} \exp(-\eta_{\pm}) \quad (3.8)$$

Kuna ülijuhtiv faasisiire toimub kõrgema kriitilise temperatuuri juures, madalam aga iseloomustab võrrandisüsteemi (2.23) täiendavat lahendit, mis ei kujuta endast ülijuhtivuspilusid, siis võrrandist (3.8) näeme, et juhul, kui $\eta_+ > \eta_- > 0$ või $\eta_- < 0$ ja $\eta_+ > 0$, on faasisiirdetemperatuuriks lahend T_c^- ning juhul, kui $0 > \eta_+ > \eta_-$ või $\eta_+ < 0$ ja $\eta_- > 0$, on faasisiirde temperatuuriks lahend T_c^+ [25]. Eespool integraali (2.20) arvutamisel tegime eelduse, et $\hbar\omega_D \gg 2k_B T_c$. Seega peab eksponendi ees olev kordaja $\frac{2\hbar\omega_D e^{\gamma}}{k_B\pi} \gg 1$, st. realistlik on juht $\eta_+ > 0$ ja $\eta_- > 0$. See tagab, et kriitiline temperatuur ei tuleks liiga kõrge, mille korral kasutatud lähendused enam ei kehti.

Saadud lahend (3.8) on sobiv koht kontrolliks, kas juhul, kui $U_{12} = 0$ või $\tilde{\eta} = 0$, jõuame tuntud Shul, Matthias, Walkeri tulemuseni [3].

Juhul, kui $U_{12}, \tilde{\eta} = 0$ lihtsustub tähistus (3.4) kujule

$$a_1 = V_{11}\rho_1, \quad a_2 = V_{22}\rho_2, \quad A_1 = V_{21}\rho_1, \quad A_2 = V_{12}\rho_2, \quad B_1 = 0, \quad B_2 = 0. \quad (3.9)$$

Asendades nüüd lihtsustatud seosed (3.9) valemisse (3.7)

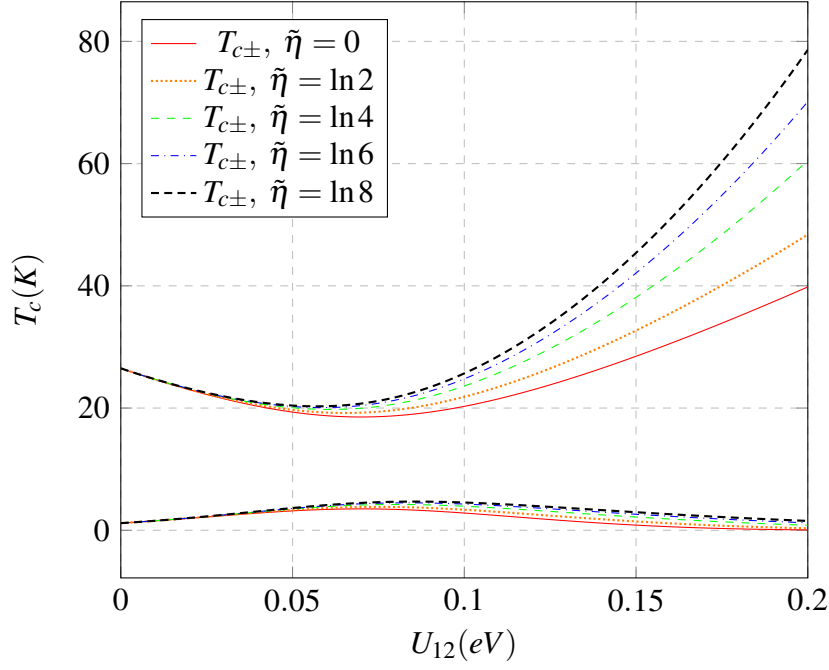
$$\eta_{\pm} = \frac{-V_{11}\rho_1 - V_{22}\rho_2 \pm \sqrt{(V_{11}\rho_1 - V_{22}\rho_2)^2 + 4V_{12}\rho_2 V_{21}\rho_1}}{2(V_{11}\rho_1 V_{22}\rho_2 - V_{21}\rho_1 V_{12}\rho_2)}. \quad (3.10)$$

Saadud η_- langeb kokku artikli [3] tulemusega.

Fikseerime parameetrid V_{11} , V_{22} , V_{12} või U_{12} ning vaatame, kuidas T_c sõltub U_{12} või V_{12} ja $\tilde{\eta}$ väärtustest. Parameetritele väärtuste andmisel tegime valiku $T_{c1} > T_{c2}$, kus $T_{c1,2}$ on autonoomsete ülijuhtivuste faasisiirete temperatuurid vastavalt tsoonides 1 ja 2, kui tsoonidevaheline interaktsioon puudub ($V_{12} = U_{12} = 0$), st. $|V_{11}|\rho_1 > |V_{22}|\rho_2$.

Joonistel 3.1 - 3.3 on kujutatud faasisiirde temperatuuri sõltuvust eelnevalt mainitud parameetritest erinevatel piirjuhtudel.

Joonisel 3.1 on kujutatud olukorda, kus $V_{12} \neq 0$. Paneme tähele, et T_c^- lahend omab miinimumi ehk toimub kahe ülijuhtivuskorrastuse konkureerimine. Hoides tsoonidevahelist tõmbeinteraktsiooni konstantsena ning "lülitades sisse" tsoonidevahelise tõukeinteraktsiooni, hakkab U_{12} -e

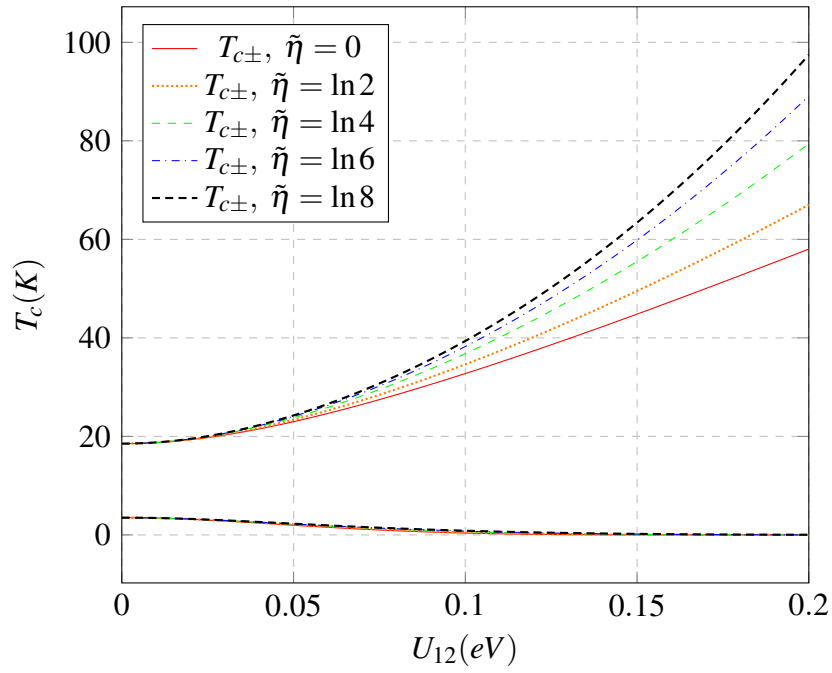


Joonis 3.1: Faasisiirde temperatuuri sõltuvus U_{12} -st erinevate $\tilde{\eta}$ väärtuste korral. Ülemised jooned - T_c^- ja alumised - T_c^+ . Parameetrid: $V_{11} = -0.3$ eV, $V_{22} = -0.2$ eV, $V_{12} = -0.07$ eV, $\hbar\omega_D = 0.04$ eV, $\rho_1 = \rho_2 = 1$ eV $^{-1}$

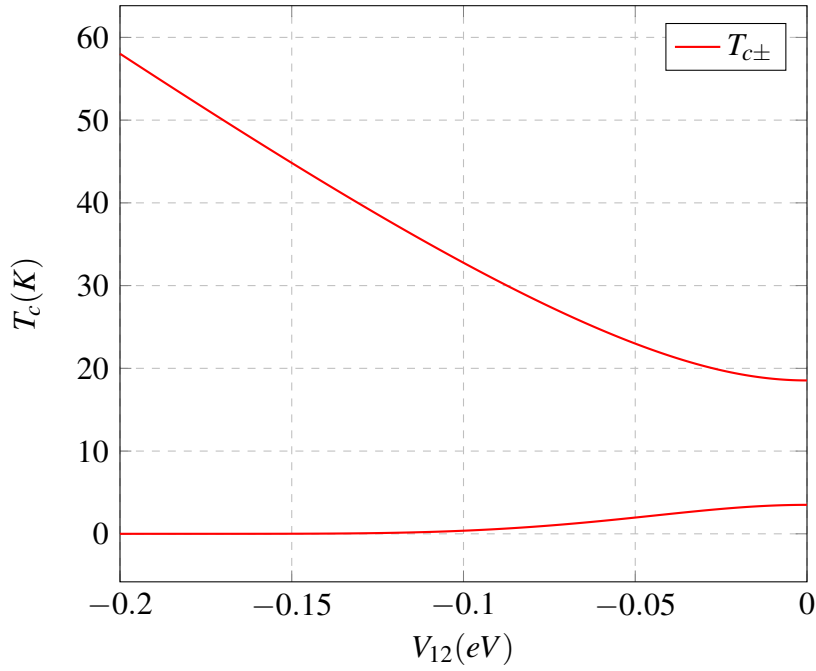
kasvades faasisiirde temperatuur esmalt alanema ning kui U_{12} ületab teatud kriitilise väärtuse, hakkab tõukeinteraktsioon domineerima ning faasisiirde temperatuur kasvab.

Jooniselt 3.1 näeme, et faasisiirde temperatuur nihkub kõrgemale, kui suurendada $\tilde{\eta}$ väärtust, st. kui suurendada tõukeinteraktsiooni energeetilist ulatust. Kuna võrrandisüsteemis (3.2) esineb igas liikmes $U_{12}\tilde{\eta}$ korrutis, väljendub see ka tulemustes. U_{12} suurendamisel on faasisiirde temperatuuri kasv seda kiirem mida suurem on $\tilde{\eta}$.

Kui võrrelda joonist 3.1 joonistega 3.2 ($V_{12} = 0$) ja 3.3 ($U_{12} = 0$), siis näeme, et puudub faasisiirde temperatuuri ekstreemum ehk võrreldes 3.1. joonisega ei toimu kahe ülijuhtivuskorrastuse konkureerimist. Samuti illustreerivad joonised 3.2 ja 3.3 asjaolu, et kui kaotame süsteemis ühe interaktsioon kanali ära, siis eraldi nii tõmbe- kui ka tõukeinteraktsioon soodustavad ülijuhtivust.



Joonis 3.2: Faasisiirde temperatuuri sõltuvus U_{12} ja $\tilde{\eta}$ väärtustest, kui $V_{12} = 0$. Ülemised jooned - T_c^- ja alumised - T_c^+ . Parameetrid: ülejäänud vt. joonis 3.1.



Joonis 3.3: Faasisiirde temperatuuri sõltuvus V_{12} -st, kui $U_{12} = 0$. Mis vastab Shul, Matthias, Walkeri mudelile [3]. Ülemine joon - T_{c-} ja alumine - T_{c+} . Parameetrid: ülejäänud vt. joonis 3.1.

4 Ülijuhtivuspilude faaside vahe

Antud peatükis uurime, kuidas sõltub ülijuhtivuspilude faaside vahe tsoonidevahelistest interaktsioonkonstantidest.

Vaatleme faaside vahet kriitilise temperatuuri lähedal. Lisaks numbrilise arvutuse tulemusenda ilmnes, et faaside vahel ei ole temperatuurisõltuvust.

Asendame võrrandisüsteemi (3.3) $\Delta_{\alpha\pm} = |\Delta_{\alpha\pm}|e^{i\phi_{\alpha\pm}}$, kus \pm tähistame vastava η_{\pm} pilu lahendit.

$$\begin{cases} \frac{|\Delta_{1\pm}|}{|\Delta_{2\pm}|} \frac{a_1\eta_{\pm}+1}{A_2\eta_{\pm}+B_2} = -e^{i(\phi_{2\pm}-\phi_{1\pm})} = \mp 1 \\ \frac{|\Delta_{1\pm}|}{|\Delta_{2\pm}|} \frac{A_1\eta_{\pm}+B_1}{a_2\eta_{\pm}+1} = -e^{i(\phi_{2\pm}-\phi_{1\pm})} = \mp 1 \end{cases} \quad (4.1)$$

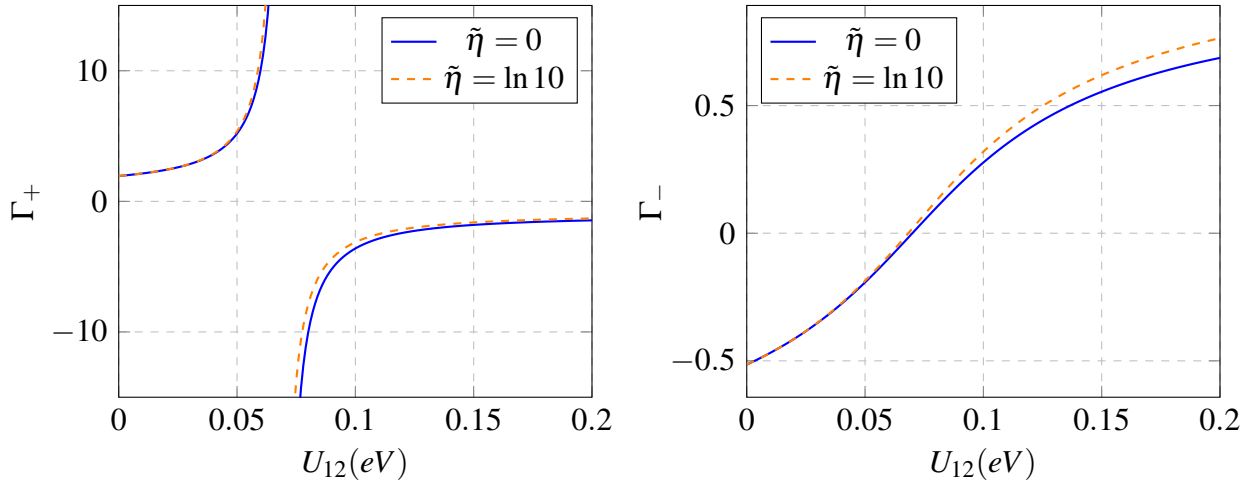
Võrduse paremale poole saime ∓ 1 , kuna võrrandite vasak pool on reaalne suurus ehk pilude faasi vahe saab olla, kas 0 või π (üldisemalt kas $2n\pi$ või $(2n+1)\pi$, kus $n \in \mathbb{Z}$). Osutub, et moodulite suhte järel olevad jagatised annavad sama tulemuse:

$$\Gamma_{\pm} \equiv \frac{a_1\eta_{\pm}+1}{A_2\eta_{\pm}+B_2} = \frac{A_1\eta_{\pm}+B_1}{a_2\eta_{\pm}+1}, \quad (4.2)$$

mis tähendab, et moodulite suhe on

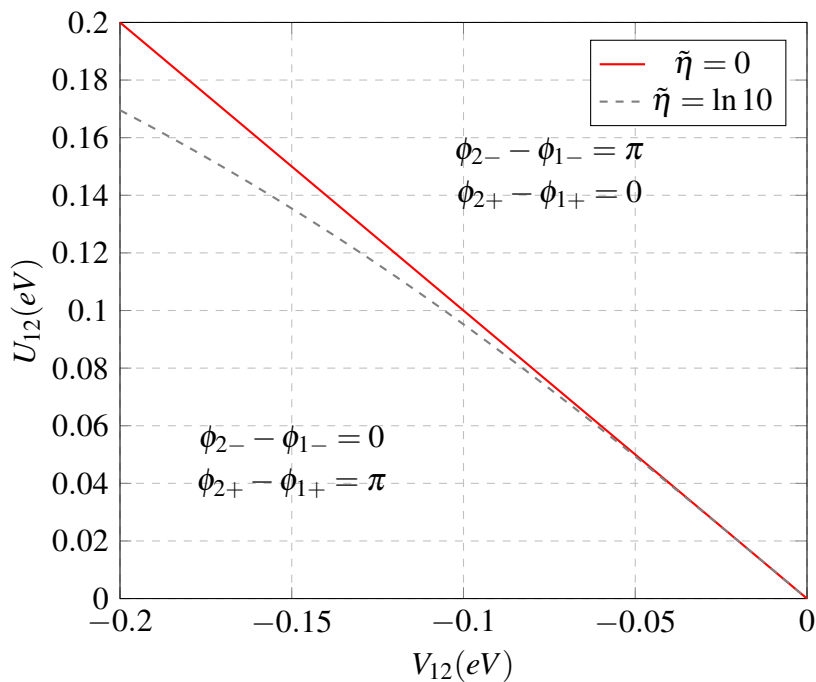
$$\frac{|\Delta_{1\pm}|}{|\Delta_{2\pm}|} = \mp \Gamma_{\pm}^{-1}, \quad (4.3)$$

märk (faaside vahe) on määratud vastavalt Γ märgile (vt. joonis 4.1), et võrduse mõlemad pooled oleksid positiivsed. Mis tähendab, et kui $\Gamma < 0$ on $\phi_2 - \phi_1 = \pi$ ja juhul kui $\Gamma > 0$ on $\phi_2 - \phi_1 = 0$. Juhul, kui $\Gamma = 0$ või $\Gamma = \pm\infty$ on faaside vahe määramata, nimetame seda punkti U_{12}^{Cr} -s.



Joonis 4.1: Γ_{\pm} sõltuvus U_{12} -st ja $\tilde{\eta}$ -st. Parameetrid: ülejäänud vt. joonis 3.1.

Jooniselt 4.1 näeme, et faaside vahe muutus leiab aset pilude $\Delta_{\alpha+}$ ja $\Delta_{\alpha-}$ jaoks samade U_{12} väärtuste juures. Kui $\tilde{\eta} = 0$ toimub faaside vahe muutus punktis, kus $U_{12} = |V_{12}|$ ning $\tilde{\eta}$ suurenemisel hakkab pilude faasihüppe punkt nihkuma.



Joonis 4.2: Faasidiagramm. Faasihüppe punkti U_{12}^{Cr} sõltuvus V_{12} -st ja $\tilde{\eta}$ -st. Parameetrid: ülejäänud vt. joonis 3.1.

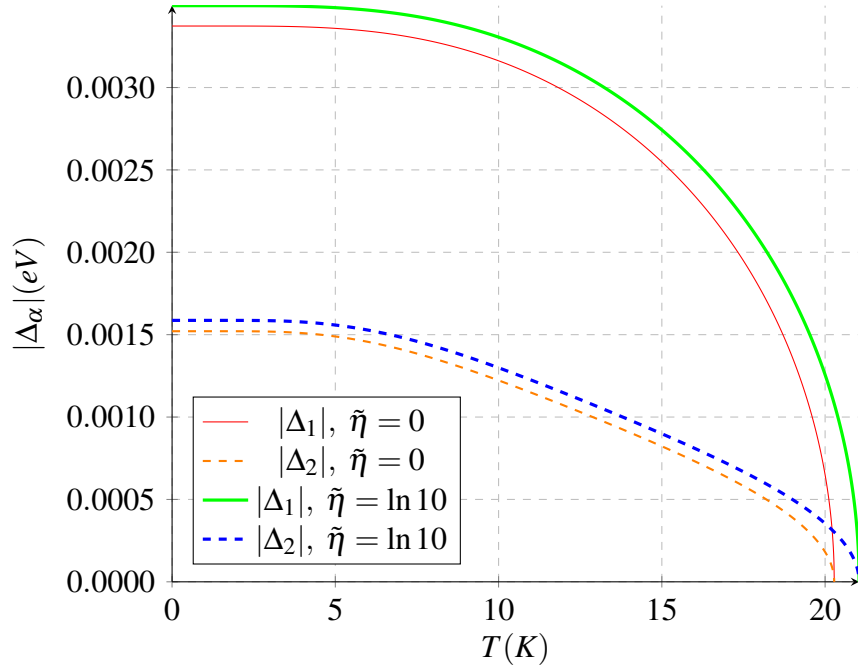
Joonised 4.1 ja 4.2 peegeldub asjaolu, et $\Delta_{\alpha+}$ ja $\Delta_{\alpha-}$ on alati vastasfaasis.

Pilude erimärgilisust on uuritud ebatavalistes ülijuhtides (unconventional superconductors), täpsemalt rauapõhiste ülijuhtide magneetimisel [26] Pilude faasivahe eksperimentaalsel mõõtmisel, üks viisideks oleks Koshelevi ja Stanevi poolt välja pakutud meetod [27].

Samuti vaadates joonist 4.1 näeme, et kui $U_{12} \rightarrow U_{12}^{Cr}$ läheneb Γ nullile või lõpmatusele, mis tähendab, et ühe pilu moodul peab T_c juures lähenema nullile, kuni lõpuks muutuvad punktis U_{12}^{Cr} pilud sõltumatuks ja tekib kaks autonoomset faasisiiret (vt. jooniseid 5.2 ja 5.3).

5 Ülijuhtivuspilude sõltuvus temperatuurist

Lahendades numbriliselt võrrandisüsteemi (2.23) saame ülijuhtivuspilude jaoks joonisel 5.1 näidatud tulemused. Joonist 5.1 saame esmalt kontrolliks võrrelda joonisega 3.1 ning näeme,

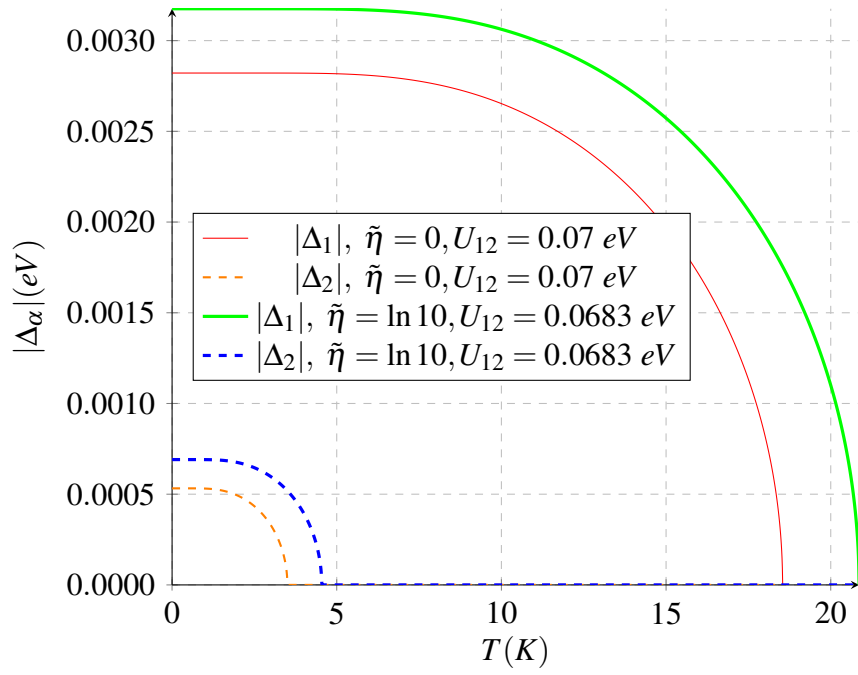


Joonis 5.1: Ülijuhtivuspilude moodulite sõltuvus temperatuurist. Parameetrid: vt joonis 3.1.

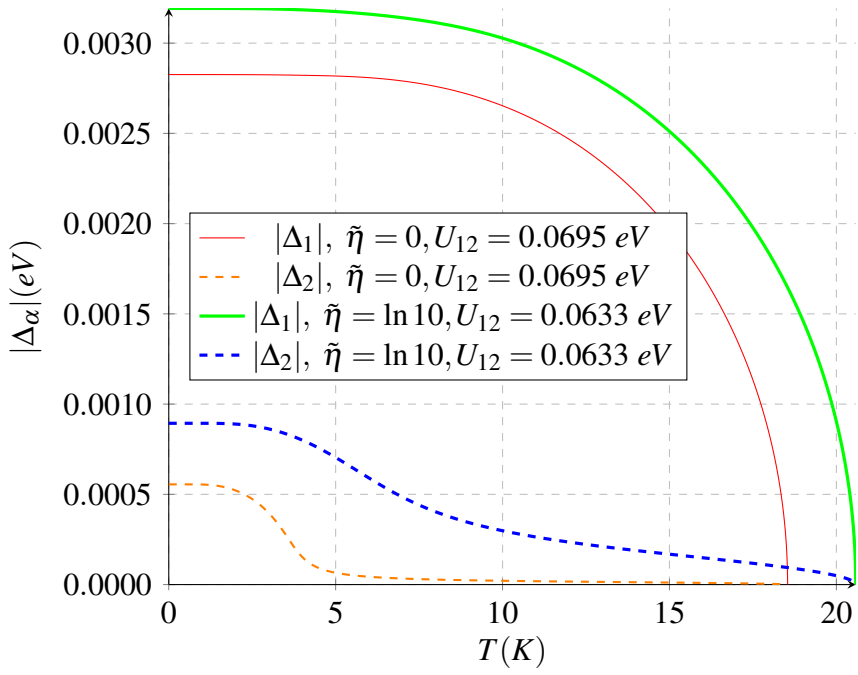
et faasisiirde temperatuurid ühtivad, mis võiks kinnitada, et olema saanud korrektsed tulemused. Samuti paneme tähele, et kui suurendada $\tilde{\eta}$ väärtust, kasvavad ka moodulid, mis näitab, et tõukeinteraktsiooni ulatuse suurendamine soodustab ülijuhtivust, mida kinnitab ka joonisel 3.1 faasisiirde temperatuuri kasvamine $\tilde{\eta}$ suurenemisel. Samuti on tulemus kooskõlas joonisel 6.1 olevate kõveratega.

Joonis 5.2 iseloomustab varem mainitud "lahti haagitud" pilude süsteemi, kui tsoonidevaheline tõukeinteraktsiooni konstant on kriitilise väärtusega. See sarnaneb olukorraga, kus tsoonidevahelised interaktsioonid puuduvad. Kuid antud juhul panustavad U_{12} ja V_{12} siiski nimetatud autonoomsetesse faasisiiretesse, kui $\tilde{\eta} \neq 0$.

Joonis 5.3 näitab ülijuhtivuspilude käitumist juhul kui U_{12} läheneb U_{12}^{Cr} -le.



Joonis 5.2: Ülijuhtivuspilude moodulite sõltuvus temperatuurist, kui $U_{12} = U_{12}^{Cr}$. Parameetrid: ülejäänud vt joonis 3.1.



Joonis 5.3: Ülijuhtivuspilude moodulite sõltuvus temperatuurist, kui U_{12} on U_{12}^{Cr} lähedal. Parameetrid: ülejäänud vt joonis 3.1.

6 Nulltemperatuurne ülijuhtivus

Arvutame ülijuhtivuspilude moodulid juhul kui temperatuur on 0 K.

Siis, saame integraali (2.20) lihtsustada

$$\lim_{T \rightarrow 0} \tanh \frac{E(\Delta_\alpha)}{2k_B T} = 1. \quad (6.1)$$

Integreerides η -t, saame tulemuseks

$$\eta(0, \Delta_\alpha) \approx \ln \frac{2\hbar\omega_D}{|\Delta_\alpha|} \equiv \eta_\alpha \quad (6.2)$$

Asendades seose (6.2) võrrandisüsteemi (2.23) ning kasutades tähistusi (3.4), saame nulltemperatuursete pilude leidmiseks võrrandisüsteemi

$$\begin{cases} \Delta_1 [1 + a_1 \eta_1] + \Delta_2 [A_2 \eta_2 + B_2] = 0 \\ \Delta_1 [A_1 \eta_1 + B_1] + \Delta_2 [1 + a_2 \eta_2] = 0 \end{cases} \quad (6.3)$$

Avaldame valemist (6.2) nulltemperatuursete ülijuhtivuspilude moodulid $|\Delta_\alpha|$ ja võrrandisüsteemi (6.3) η_α

$$\begin{cases} |\Delta_1| = 2\hbar\omega_D \exp \left\{ \frac{a_2 - A_2 B_1 + \kappa^{-1}(a_2 B_2 - A_2)}{a_1 a_2 - A_1 A_2} \right\} \\ |\Delta_2| = 2\hbar\omega_D \exp \left\{ \frac{a_1 - A_1 B_2 + \kappa(a_1 B_1 - A_1)}{a_1 a_2 - A_1 A_2} \right\}, \end{cases} \quad (6.4)$$

kus oleme tähistanud

$$\kappa \equiv \frac{\Delta_1}{\Delta_2} = \frac{|\Delta_1|}{|\Delta_2|} e^{i(\phi_1 - \phi_2)} = \pm \frac{|\Delta_1|}{|\Delta_2|}. \quad (6.5)$$

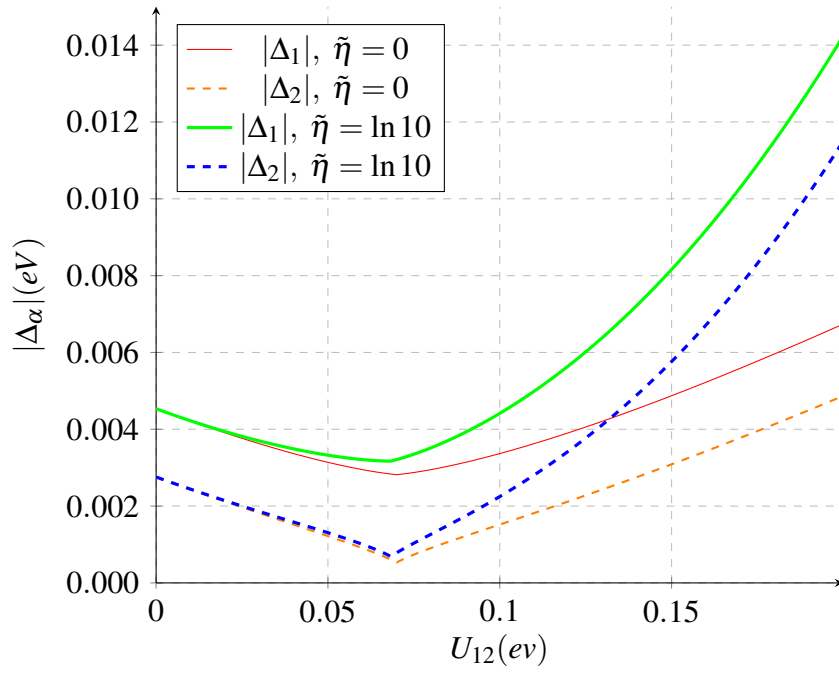
Pilude moodulite suhte ees oleva märgi määravad tsoonidevahelised interaktsioonikonstandid (vt joonis 4.2).

Joonisel 6.1 näeme jällegi tsoonidevaheliste interaktsioonide konkurentsi. Samuti näeme, et väikese tõukeinteraktsiooni korral ei sõltu pilude moodulid oluliselt interaktsioonide energgeetilisest ulatusest. Kuid kui tõukeinteraktsioon ületab kriitilise väärtuse, hakkab energgeetiline ulatus tugevamalt mõjutama pilude mooduleid. Punktis U_{12}^{Cr} olev terav üleminek on tingitud ülijuhtivuspilude faaside vahe muutusest.

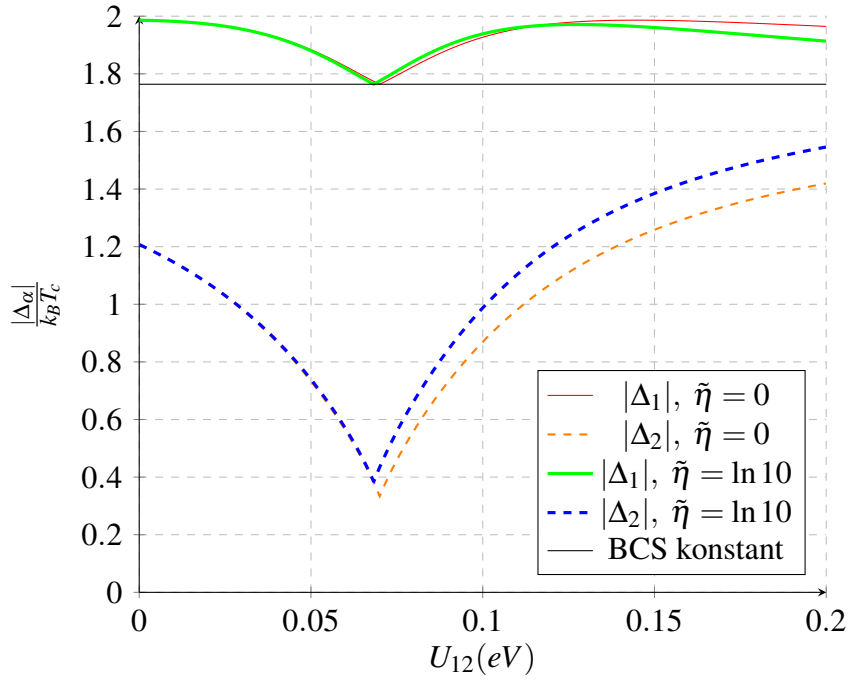
Edasi uurime, kuidas sõltub nulltemperatuursete ülijuhtivuspilude moodulite (6.4) ja faasisiirde temperatuuri (3.8) suhe tsoonidevahelisest interaktsioonist

$$\begin{cases} \frac{|\Delta_1|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{e^\gamma} \exp \left\{ \frac{a_2 - A_2 B_1 + \kappa^{-1}(a_2 B_2 - A_2)}{a_1 a_2 - A_1 A_2} + \eta \right\} \\ \frac{|\Delta_2|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{e^\gamma} \exp \left\{ \frac{a_1 - A_1 B_2 + \kappa(a_1 B_1 - A_1)}{a_1 a_2 - A_1 A_2} + \eta \right\}, \end{cases} \quad (6.6)$$

Ühetsoonilises BCS-teoorias on vaadeldaval suurusel universaalne väärtus $\frac{|\Delta|}{k_B T_c} \approx 1,764$, mis



Joonis 6.1: Nulltemperatuursete ülijuhtivuspilude moodulite sõltuvus U_{12} -st. Parameetrid: ülejäänud vt. joonis 3.1.



Joonis 6.2: Nulltemperatuursete ülijuhtivuspilude moodulite ja kriitilise temperatuuri suhte sõltuvus U_{12} -st ja $\tilde{\eta}$. Parameetrid: ülejäänud vt. joonis 3.1.

näitab, et nulltemperatuurse ülijuhtivuspilu energia on võrdeline faasisiirde temperatuuri energiaga [24]. Seega, kui võtame võrrandisüsteemis (6.6) tsoonidevahelised interaktsioonikons-

tandid võrdseks nulliga ($U_{12} = V_{12} = 0$), teiseneb võrrandisüsteem jällegi kaheks sõltumatuks võrrandiks, kusjuures

$$\frac{|\Delta_\alpha|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{e^\gamma} \approx 1,764 \dots \quad (6.7)$$

Kui võrrelda saadud konstanti joonisel 6.2 oleva $\frac{\Delta_1}{k_B T_c}$ kõveraga, siis näeme, et suhe on punktis U_{12}^{Cr} mainitud universaalse konstandiga (6.7) võrdne, mujal aga natuke suurem. Samal ajal on $\frac{\Delta_2}{k_B T_c} < 1,764$, mis on kooskõlas Kreasini ja Wolfi poolt saadud tulemusega [28].

Kokkuvõte

Käesolevas töös on uuritud, kuidas mitme interaktsioonikanaliga kahetsoonilises ülijuhis mõjutavad tsoonidevahelised interaktsioonid ülijuhtivust. Lähtusime kahetsoonilise ülijuhi elektro-nalamsüsteemi hamiltoniaanist. Rakendades hamiltoniaanile keskmise välja lähendust, läbi mille defineerisime tekkinud anomaalsete keskmistega ülijuhtivuspilude võrrandid. Keskmise välja hamiltoniaanile rakendasime Bogoliubov-Valatini teisendust ning saime pilude jaoks integraalse võrrandisüsteemi. Saadud võrrandisüsteemi on võimalik analüütiliselt lahendada teatud erijuhtudel, kus integraalne võrrandisüsteem teiseneb lineaarseks, milleks on: normaalfaasist ülijuhtivasse faasi siirdumise temperatuur (kriitiline temperatuur) ja nulltemperatuurine ülijuhtivus. Samuti lahendasime integraalset võrrandisüsteemi numbriliselt, saades ülijuhtivuspilude temperatuurse sõltuvuse.

Kriitilise temperatuuri (T_c) avaldist analüüsist tekkis, tõmbeinteraktsiooni konstantsena hoides ja tõukeinteraktsiooni suurendades, T_c kõverale miinimum. Kui võtta aga üks tsoonidevaheline interaktsioon nulliks (kas tõmbe või tõuke), kaob mainitud miinimum ära ning toimub tsoonidevahelise interaktsiooni suurendamisel T_c monotoone kasvamine. Seega eraldi interaktsioonid soodustavad ülijuhtivust, kuid koos mõjudes tekib konkurents.

Ülijuhtivuspilude faaside vahet analüüsist osutus, et vastavalt tsoonidevahelistele interaktsioonikonstantidele saavad pilud olla kas samas- või vastasfaasis ($\Delta\phi = 0, \Delta\phi = \pi$). Kuid ilmnes ka punkt, kus faas on määramata, st. efektiivne summaarne tsoonidevaheline interaktsioon on null. Vastavate interaktsioonikonstantide korral tekib süsteemis kaks sõltumatut faasisiiret kummagi pilu jaoks.

Nulltemperatuuse lahendi korral on ülijuhtivuspilud oma suurima väärtusega, millest tulenevalt ilmneb tsoonidevaheliste interaktsioonide konkurents kõige tugevamalt. Vaatlesime veel nulltemperatuuste pilude ja faasisiirde temperatuuri suhet tugevama ülijuhtivasega tsoonis. Ilmnes, et juhul, kui interaktsioonid on efektiivselt võrdsed, saame universaalse ühetsoonilise BCS teooria konstandi, mujal aga on suhe suurem kui mainitud konstant. Saadud tulemus viitab asjaolule, et juhul, kui pilud on sõltumatud, on näivalt tegu ühetsoonilise mudeliga.

Töö edasiseks arendamiseks võiks:

- 1) analüüsida termodünaamilisi suurusi (vabaenergia, entroopia, soojusmahtuvus);
- 2) uurida, $\Delta_{\alpha+}$ temperatuurse sõltuvuse muutumist tsoonidevahelise interaktsiooni varieerimisel nõrga interaktsiooni lähedal;
- 3) määrata, millised oleksid tõmbe- ja tõukeinteraktsioonid mingis konkreetsetes kahetsoonilises materjalis.

Tänuavaldused

Soovin tänada oma juhendajat Teet Ördi mitmekülgse abi eest lõputöö valmimise protsessis. Lisaks sisukate ja huvitavate iganädalaste jutuajamiste eest, mis avardasid rohkesti minu teadmisi tahkisteooria valdkonnas. Samuti soovin tänada Külleke Rägot abistavate konsultatsioonide eest.

Viited

- [1] H. K. Onnes. "The superconductivity of mercury". *Commun. Phy. Lab. Univ. Leiden.*, 122-124, 1911.
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer. "Theory of superconductivity". *Phys. Rev.*, 108, 1957.
- [3] H. Shul, B. T. Matthias, L. R. Walker, "Bardeen- Cooper- Schrieffer theory of superconductivity in the case of overlapping bands". *Phys. Rev. Lett.*, 3, 552, 1952.
- [4] M. Zehetemayer. " A review of two-band superconductivity: materials and effects on the thermodynamic and reversible mixed-state properties". *Supercond. Sci. Technol.*, 26 043001, 2013.
- [5] X X Xi. "Two-band superconductor magnesium diboride". *Rep. Prog. Phys.*, 71 116501, 2008.
- [6] C. Chou, D. White, H. L. Johnston. "Heat capacity in the normal and superconducting states and critical field of niobium". *Phys. Rev.* 109, 788, 1958.
- [7] N. E. Phillips. "Heat capacity of aluminium between 0.1 K and 4.0 K". *Phys. Rev.*, 114, 3, 676-685, 1959.
- [8] G. S. Belvins, W. Gordy, W. M. Fairbank. "Superconductivity at millimeter wave frequencies". *Phys. Rev.*, 100(4), 1215-1216, 1955.
- [9] J. W. Stout, L. Guttman. "Meissner effect in superconducting alloys of indium and thallium". *Phys. Rev.*, 79, 396, 1950.
- [10] J. De Launay. "The isotope effect in superconductivity". *Phys. Rev.*, 93(4), 661-665, 1954.
- [11] A. Marouchkine *Room- Temperature Superconductivity*. Cambridge International Science Publishing, 7 Meadow Walk, Great Abington, Cambridge CB1 6AZ, UK, 2004.
- [12] J. E. Hirsch. "BCS theory of superconductivity: it is time to question its validity". *Phys.Scr.*, 80, 035702, 2009.
- [13] G. M. Eliashberg. "Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor". *Sov. Phys. JETP*, 11, 697-702, 1960.
- [14] H. Nagao, S. P. Kruchnin, A. M. Yarmenko, K. Yamaguchi. "Multiband superconductivity". *Int. J. Mod. Phys. B*, 16, 3419-3428, 2002.
- [15] J. Kondo "Superconductivity in transition metals". *Prog. Theor. Phys.*, 29, 1, 1963.

- [16] P. Szabo, P. Samuely, J. Kacmarčík, Thierry Klein, J. Marcus, *et al.*. "Evidence for two Superconducting energy gaps in MgB_2 by point-contact spectroscopy". *Phys. Rev. Let.*, 87, 137005, 2001.
- [17] S. Tsuda, *et al.*. "Definitive experimental evidence for two-band superconductivity in MgB_2 ". *Phys. Rev. Let.*, 91, 127001, 2003.
- [18] T. Örd. "On interpretation of superconducting orders induced by interband repulsion and attraction". *Proc. Estonian Acad. Sci. Phys. Math.*, 41, 4, 283-287, 1992.
- [19] P. W. Anderson. "Random-phase approximation in the theory of superconductivity". *Phys. Rev.*, 112, 6, 1900-1916, 1958.
- [20] Y. Nakajima, T. Nakagawa, T. Tamegai, H. Harima. "Specific-heat evidence for two-gap superconductivity in the ternary-iron silicide $\text{Lu}_2\text{Fe}_3\text{Si}_5$ ". *Phys. Rev.*, 100, 157001, 2008.
- [21] C. L. Huang, J.-Y. Lin, Y. T. Chang, C. P. Sun, H. Y. Shen, C. C. Chou, H. Berger, T. K. Lee, H. D. Yang. "Experimental evidence for a two-gap structure of superconducting NbSe_2 : A specific-heat study in external magnetic fields". *Phys. Rev. B.*, 76, 212504, 2007.
- [22] A. V. Sologubenko, J. Jun, S. M. Kazakov, J. Karpinski, H. R. Ott. "Thermal conductivity of single-crystalline MgB_2 ". *Phys. Rev. B.*, 66, 014504, 2002.
- [23] N. N. Bogoliubov. "On a New Method in the Theory. of Superconductivity". *Nuovo Cimento*, 7, 794-805, 1958.
- [24] M. Tinkham *Introduction to Superconductivity*. Dover Publications INC., Mineola, New York, 2004.
- [25] N. Kristoffel, T. Örd, K. Răgi. " MgB_2 two-gap superconductivity with intra- and interband couplings". *Europhys Lett.*, 61(1), 109-115, 2003.
- [26] V. G. Stanev, A. E. Koshelev. "Anomalous proximity effects at the interface of s- and s_{\pm} -superconductors". *Phys. Rev. B.*, 86, 174515, 2012.
- [27] A. E. Koshelev, V. Stanev. "Proximity fingerprint of s_{\pm} -superconductivity". *EPL.*, 96, 27014, 2011.
- [28] V.Z. Kresin, S.A.Wolf "Multigap structure in the cuprates". *Physica C*, 169, 476-484, 1990.

Lihtlitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja lõputöö üldsusele kättesaadavaks tegemiseks

Mina, Taimo Priinits,

- 1) annan Tartu Ülikoolile tasuta loa (lihtlitsentsi) enda loodud teose

Konkureerivad tsoonidevahelised interaktsioonid kahepilulises ülijuhis,

mille juhendaja on Teet Örd, Ph.D.,

- (a) reprodutseerimiseks säilitamise ja üldsusele kättesaadavaks tegemise eesmärgil, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace-is lisamise eesmärgil kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni;
 - (b) üldsusele kättesaadavaks tegemiseks Tartu Ülikooli veebikeskkonna kaudu, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace'i kaudu kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni.
- 2) olen teadlik, et punktis 1 nimetatud õigused jäävad alles ka autorile.
- 3) kinnitan, et lihtlitsentsi andmisega ei rikuta teiste isikute intellektuaalomandi ega isikuandmete kaitse seadusest tulenevaid õigusi.

Tartu, 31. mai 2019. a.